

## ИССЛЕДОВАНИЕ МАЛЫХ ГРУПП ЭЛЕКТРОНОВ В МОЛИБДЕНЕ

М. А. АРУТЮНЯН, В. Ф. ГАНТМАХЕР, В. А. ГАСПАРОВ

Проведены измерения радиус-векторов эллипсоидальной части поверхности Ферми (ПФ) в трех главных сечениях с высокой точностью (0,5%) методом радиочастотного размерного эффекта на толстых образцах ( $d \approx 1$  мм). На основе экспериментальных результатов на ЭВМ получено аналитическое выражение, описывающее эту ПФ. Вычисленные значения радиус-векторов совпадают с измеренными в пределах точности эксперимента.

Вблизи точек  $N$  зоны Бриллюэна молибдена (обозначения см. в [1]) расположены малые участки ферми-поверхности, имеющие форму, близкую к эллипсоидальной. Всего в зоне Бриллюэна имеется шесть таких эквивалентных «эллипсоидов», по-разному повернутых друг относительно друга. Это обстоятельство затрудняло разделение вкладов от этих поверхностей на эксперименте и снижало точность измерения их размеров. Положение дополнительно ухудшалось вследствие того, что другие участки ферми-поверхности, так называемые сфероиды, имеют близкие размеры [1].

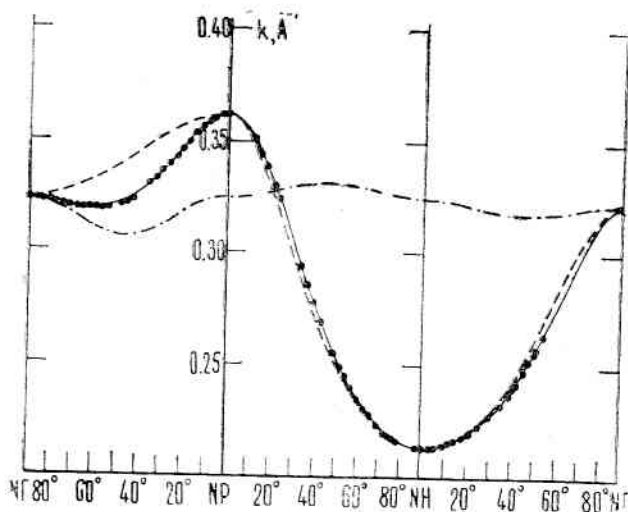
Вместе с тем требования к точности измерений размеров ферми-поверхности с каждым годом повышаются по мере того, как растет точность теоретических расчетов. Наиболее тщательные измерения размеров «эллипсоидов» вблизи точек  $N$  были выполнены в работе [2] методом де Гааз-ван Альфена (ДГВА). В настоящем сообщении приводятся результаты измерений этих же поверхностей другим методом — при помощи радиочастотного размерного эффекта (РРЭ). При этом были использованы более толстые, чем ранее [1], образцы, что существенно повышает точность измерений [3].

Методика исследований и идентификация линий РРЭ описаны в [1, 3]. Линии РРЭ записывались на образцах с отношением электросопротивлений  $\gamma \approx 1 \cdot 10^5$  и толщиной  $d \approx 1$  мм на частотах 3—8 МГц и при температуре 1,2°К. Нормали  $\mathbf{n}$  к поверхности образцов совпадали с направлениями [100] и [110]. Использование в 5 раз более толстых образцов, чем в [1], привело к десятикратному увеличению точности измерений радиус-векторов ПФ (0,5% по сравнению с 5% в [1]) за счет несимметричного сужения линий РРЭ и уменьшения погрешности в определении толщины  $d$  [3].

Результаты измерений приведены в табл. 1 и на рисунке. В табл. 1 указаны размеры поверхностей вдоль линий  $NH$  зоны Бриллюэна (ось [110], размер  $a$ ),  $NI$  (ось [011], размер  $b$ ) и  $NP$  (ось [100], размер  $c$ ). Наряду с нашими данными в таблице приведены также результаты исследования эффекта де Гааза-ван Альфена [2] и теоретических расчетов релятивистским методом Коринги-Кона—Ростокера (РККР) [4] с подгонкой параметров по данным [2].

Таблица 1  
Размеры дырочных «эллипсоидов» ПФ молибдена  
(в  $\text{\AA}^{-1}$ )

Направление	РРЭ	ДГВА [3]	РККР [4]
$NH$ ( $a$ )	0,213	0,216	0,2164
$N\Gamma$ ( $b$ )	0,324	0,325	0,3242
$NP$ ( $c$ )	0,362	0,365	0,3609



Анизотропия волновых векторов «эллипсоида» в трех взаимно перпендикулярных плоскостях симметрии: ● — экспериментальные точки; сплошная и штрих-пунктирные кривые соответствуют расчетной поверхности в первичной и преобразованной системах координат, пунктирная кривая — в первичной и преобразованной системах координат, пунктирная кривая —

Как видно из рисунка, реальная поверхность отличается от эллипсоида. Хотя это отличие не превышает 5%, оно четко прослеживается благодаря высокой точности измерений. Неравномерное распределение экспериментальных точек вдоль оси абсцисс обусловлено перекрытием теневых проекций «эллипсоидов» между собой и со сфероидами.

Для аналитического описания реальной поверхности мы использовали разложение радиус-вектора  $k$  в ряд по сферическим гармоникам:

$$k(\theta, \varphi) = \sum_{l, m} \alpha_{l, m} C_{l, m}(\theta, \varphi), \quad (1)$$

где  $C_{l, m}$  — ортонормированные сферические функции степени  $l$  и порядка  $m$ , заданные на единичной сфере:

$$C_{l, m}(\theta, \varphi) = \bar{P}_l^m(\cos \theta) \cdot \cos(m\varphi), \quad (2)$$

а  $\bar{P}_l^m$  — нормированные присоединенные полиномы Лежандра [5]. Здесь  $l$  и  $m$  — целые числа, принимающие четные значения в соответствии с сим-

метрией поверхности [6]. Для уменьшения анизотропии радиус-вектора  $k$  было использовано преобразование координат [6]

$$k'_x = \alpha k_x, \quad k'_y = k_y, \quad k'_z = \gamma k_z, \quad (3)$$

где  $\alpha \equiv b/a$ , а  $\gamma \equiv b/c$ . Такое преобразование переводит эллипсоид в сферу радиуса  $b$ , а реальную поверхность в новую, которая отличается от сферы в меру отличия исходной поверхности от простой эллипсоидальной модели. Формулы перехода из одной системы сферических координат  $(k, \theta, \varphi)$  в другую  $(k', \theta', \varphi')$  приведены в [6].

Коэффициенты разложения функции  $k'(\theta', \varphi')$  в ряд (1) находились методом наименьших квадратов на ЭВМ «Наири-С» и приведены в табл. 2.

Таблица 2

$\alpha_{0,0}$	$\alpha_{2,0}$	$\alpha_{2,2}$	$\alpha_{4,0}$	$\alpha_{4,2}$	$\alpha_{4,4}$
45,2036	0,0564	0,7943	0,1888	0,8153	0,2532

Число членов ряда (1) увеличивалось до тех пор, пока разница между вычисленными и экспериментальными значениями  $(k_{\text{выч}} - k_{\text{эксп}})/k_{\text{эксп}}$  не оказывалась меньше неточности измерений. Уже для шести членов ряда удалось получить согласие с экспериментом в пределах  $\pm 0,5\%$ . Сечения восстановленной поверхности представлены на рисунке сплошной кривой в исходной системе и штрих-пунктирной — в преобразованной системе координат.

Из табл. 1 видно хорошее согласие наших данных с эффектом ДГВА [2] и теоретическими вычислениями. Следует отметить, однако, что для восстановления форм «эллипсоидов» с помощью инверсионной математической процедуры, использованной в [2], потребовалось 45 членов в разложении (1).

Таким образом, в результате проведенных исследований получено сравнительно простое аналитическое выражение, описывающее «эллипсоидальную» часть ПФ молибдена с точностью  $\pm 0,5\%$ .

Авторы благодарны С. В. Плющевой за предоставление слитка сверхчистого молибдена и Ю. С. Красюкову за помощь при вычислениях на ЭВМ.

Ереванский физический  
институт

Поступила 12.1.1978

#### ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Бойко, В. А. Гаспаров. ЖЭТФ, 61, 11 (1971).
2. J. A. Hoekstra, J. L. Stanford. Phys. Rev., B8, 1416 (1973).
3. V. A. Gasparov, M. H. Harutiunian. Phys. Stat. Sol. (b), 74, K107 (1976).
4. J. V. Ketterson et al. Phys. Rev., B11, 1447 (1975).
5. С. Л. Белоусов. Таблицы нормированных присоединенных полиномов Лежандра. Изд. АН СССР, М., 1956.
6. J. V. Ketterson, L. K. Windmiller. Phys. Rev., B1, 463 (1970).

## ԷԼԵԿՏՐՈՆՆԵՐԻ ՓՈՔՐ ԽՄՐԵՐԻ ՈՒՍՈՒՄՆԱՍԻՐՈՒԹՅՈՒՆԸ ՄՈԼԻԲԴԵՆՈՒՄ

Մ. Շ. ՉՍՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Վ. Ֆ. ԳՍՆՄԱԽԵՐ, Վ. Ս. ԳԱՍՊԱՐՈՎ

Ռադիոհաճախային չափային էֆեկտի օգնությամբ մեծ ճշտությամբ (0,5%) չափված են մոլիբդենի Ֆերմիի մակերևույթի էլիպսոիդալ մասի շառավիղ-վեկտորները երեք զլխավոր հատույթներում (նմուշի հաստությունը՝  $d \approx 1$  մմ է): Հիմնվելով էքսպերիմենտալ արդյունքի վրա, «նախրի» էլեկտրոնային հաշվիչ մեքենայի օգնությամբ ստացված է անալիտիկ արտահայտություն, որը նկարագրում է տվյալ Ֆերմիի մակերևույթը: Շառավիղ-վեկտորների չափված և հաշված արժեքները համընկնում են չափման ճշտության սահմաններում:

INVESTIGATIONS OF SMALL ELECTRON GROUPS  
IN MOLYBDENUM

M. H. ARUTYUNYAN, V. F. GANTMAKHER, V. A. GASPAROV

Radius-vectors of the ellipsoidal Fermi surface (EFS) of  $Mo$  in all the symmetry planes were measured with high accuracy (0,5%) by means of the radio-frequency size effect in thick samples ( $d \approx 1$  mm). Using the experimental data, an analytical expression is obtained for EFS. The calculated EFS is in a good agreement with the measured one within the errors of the experiment.